

ABSTRAK

ARIS SUSILO, 2022, PENAMBATAN DAN SIMULASI DINAMIKA MOLEKULER ANTARA DESAIN VAKSIN DENGAN ADJUVAN BETA DEFENSIN DAN *TOLL LIKE RECEPTOR 4* (TLR4), PROPOSAL SKRIPSI, PROGRAM STUDI S1 FARMASI, FAKULTAS FARMASI UNIVERSITAS SETIA BUDI.

SARS-COV-2 adalah virus baru yang masih berkembang pesat di dunia dan ditetapkan sebagai ancaman global. Sampai saat ini pengembangan vaksin SARS-COV-2 masih sebagai prioritas bagi para peneliti di seluruh dunia. Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui interaksi atom desain vaksin dengan *Toll like Receptor 4*, sehingga mendapatkan desain vaksin yang aman dan stabil yang dilihat pada data (*Root Mean Square Deviation*) RMSD dan (*Root Mean Square Fluctuation*) RMSF yang dihasilkan pada proses simulasi dinamika molekuler.

Perancangan desain vaksin berbasis *webserver*. Desain vaksin dibuat dengan menggunakan sequen yang didapatkan dari Uniprot. Sekuen dengan antigenitas tertinggi dilakukan identifikasi Epitop (*Major Hiscompatibility*) MHC-1, II, dan Sel B. Epitop dilakukan konstruksi 3D dengan menggabungkan epitop yang didapatkan dengan adjuvan *Beta Defensin*. Penambatan molekuler dalam penelitian ini dilakukan dengan menggunakan *webserver* HADDOCK 2.4. serta simulasi dinamika molekuler menggunakan *software* YASARA.

Desain vaksin yang didapatkan memiliki antigenitas 0.5114, desain vaksin juga diprediksi stabil secara struktur dengan bobot molekul 42.47 Kda, memiliki nilai GRAVY -0.056, Nilai Procheck 86.15%, dan ERRAT 0 error. Penambatan molekuler memiliki nilai -104.867. Simulasi dinamika molekuler menggunakan YASARA mendapatkan rata-rata RMSD 5.244 dan RMSF 2.05 Angstrom. Nilai penambatan molekuler HADDOCK 2.4 memiliki nilai yang baik sehingga dapat disimpulkan desain vaksin dengan adjuvan *Beta Defensin* dan TLR 4 diprediksi memiliki efektivitas dalam merespon imun tubuh, sedangkan nilai rata-rata RMSD dan RMSF yang dihasilkan dari simulasi dinamika molekuler juga menunjukkan bahwa desain vaksin dengan adjuvan *Beta Defensin* dan TLR 4 diprediksi dapat berikatan kuat dalam menimbulkan respon imun.

Kata Kunci : SARS-CoV-2, desain vaksin, penambatan molekuler, dinamika molekuler

ABSTRACT

ARIS SUSILO, 2022, MOLECULAR DOCKING AND SIMULATION OF MOLECULAR DYNAMICS MIDST VACCINE DESIGN WITH ADJUVANT BETA DEFENSIN AND *TOLL LIKE RECEPTOR 4* (TLR4), UNDERGRADUATE OF THESIS, BACHELOR OF PHARMACY, FACULTY OF PHARMACY, SETIA BUDI UNIVERSITY, SURAKARTA. Supervised by Dr. apt. Rina Herowati, M.Si and Dian Marlina, S.Farm., M.Sc., Ph.D

SARS-COV-2 is a new virus that is still growing rapidly in the world and is designated as a global threat. Until now the development of the SARS-CoV-2 vaccine is still a priority for researchers around the world. This study aims to determine the interaction of atomic vaccine design with *Toll like Receptor 4*, so as to obtain a safe and stable vaccine design as seen in the RMSD (*Root Mean Square Deviation*) and RMSF (*Root Mean Square Fluctuation*) data generated in the molecular dynamics simulation process.

based vaccine design *Websserver*. The vaccine design was made using sequences obtained from Uniprot. Sequences with the highest antigenicity were identified by Epitope (*Major Hiscompatibility*) MHC-1, II, and B cells. Epitope was constructed in 3D by combining the epitope obtained with the adjuvant *Bete Defensin*. Molecular docking in this study was carried out using *websserver* HADDOCK 2.4 as well as molecular dynamics simulation using *eYASARA* software.

The vaccine design obtained has an antigenicity of 0.5114, the vaccine design is also predicted to be structurally stable with a molecular weight of 42.47 Kda, has a GRAVY value of -0.056, a Procheck value of 86.15%, and an ERRAT of 0 error. Molecular anchoring has a value of -104.867. Molecular dynamics simulation using YASARA obtained an average of RMSD 5.244 and RMSF 2.05 Angstrom. The HADDOCK 2.4 molecular anchoring value has a good value so that it can be concluded that the vaccine design with *Beta Defensin* and TLR 4 adjuvants is predicted to have effectiveness in responding to the body's immune system, while the average RMSD and RMSF values generated from molecular dynamics simulations also indicate that the vaccine design with adjuvants *Beta Defensin* and TLR 4 predictable can bind strongly to induce an immune response.

Keywords: SARS-CoV-2, vaccine design, molecular tethering, molecular dynamics